Der Zweiergruppenansatz für ein Fermionensystem mit Wechselwirkung und seine Anwendungsmöglichkeiten

von

Martin Heim

aus Nürnberg

Erlangen 1964

1963 № 194

Der Zweiergruppenansatz für ein Fermionensystem mit Wechselwirkung und seine Anwendungsmöglichkeiten

Inauguraldissertation
der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
zur
Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von
Martin Heim
aus Nürnberg

R.UNIV.
BIBLIOTHEEK
LEIDEN

Als Dissertation genehmigt
von der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung : 19.2.1964
Dekan : Universitätsprofessor Dr. H. Behrens
Berichterstatter : Universitätsprofessor Dr. H. Volz
Berichterstatter : Universitätsprofessor Dr. L. Waldmann

Einleitung

Wenn man ein System von 2N ungestörten Fermiteilchen im Kasten vom Volumen Ω wellenmechanisch behandeln will, so verwendet man im allgemeinen als Ausgangspunkt eine aus ebenen Wellen aufgebaute Wellenfunktion. Für den Grundzustand sind jene die N ebenen Wellen mit den kleinstmöglichen Impulsen. Diese erfüllen im Impulsraum die bekannte Fermikugel, deren Radius einer maximalen Wellenzahl k_f entspricht. Der Maximalimpuls ist nur von der Teilchendichte abhängig. Zu jedem Impuls gehören zwei Teilchen mit entgegengerichtetem Spin.

Für das Einzelteilchen stellt die ebene Welle eine kräftefreie Bewegung dar. Durch die Antisymmetrisierung bekommt das Gesamtsystem der vorgegebenen Fermionen eine gewisse räumliche Korrelation, die sich z.B. darin äußert, daß niemals zwei Teilchen mit parallelem Spin am gleichen Ort sein können. Die Wahrscheinlichkeit w, mit der sich ein Teilchen im Abstand r von einem zweiten findet, hängt davon ab, ob die beiden Teilchen parallelen oder antiparallelen Spin besitzen. Die Rechnung ergibt das in Abb.1 dargestellte Verhalten.

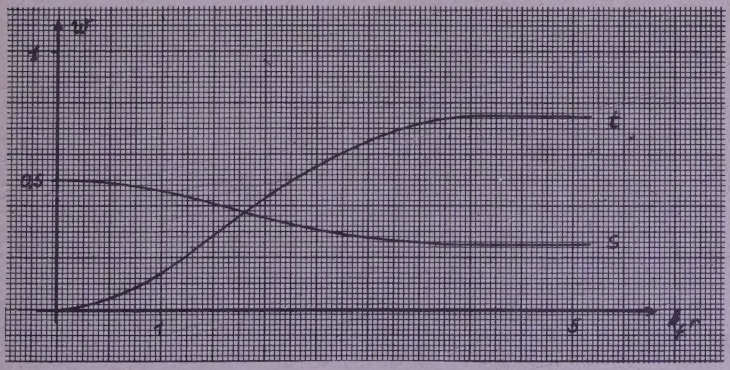

Abb. 1

Die Kurve t stellt die Abstandswahrscheinlichkeit eines Triplettpaares, s die eines Singulettpaares dar.

Es ist nun interessant, daß sich diese Figur qualitativ auch von einem ganz anderen Ausgangspunkt her ergibt. Stellen wir uns vor, daß je zwei Fermionen mit entgegengerichtetem Spin durch eine geeignete Wellenfunktion zu einer Zweiergruppe zusammengekoppelt werden und daß N solcher Gruppen in dem vorgegebenen Volumen frei herumschwimmen. Im mathematischen Ansatz bedeutet dies, daß die Schwerpunktskoordinaten der Gruppe in der Wellenfunktion nicht vorkommen.
Die beiden Teilchen, die in ein und derselben Gruppe verbunden sind, bilden ein Singulettpaar. Teilchen, die zu verschiedenen Gruppen gehören, werden sich gemäß den statistischen Gewichten im Verhältnis 3:1 zu Triplett- bzw. Singulettsystemen verkoppeln.
Die Beiträge solcher Paare zu den betreffenden Abstandswahrscheinlichkeiten werden außerhalb der eigenen Gruppe also konstante Werte sein, die sich wie 3:1 verhalten, während innerhalb einer Gruppe nur das darin enthaltene Paar seinen Beitrag zur Singulettwahrscheinlichkeit liefert. Die Triplettwahrscheinlichkeit wird im Innern - wegen der Undurchdringlichkeit der Gruppe - auf Null absinken.

Um die Gesamtwellenfunktion eines so aufgebauten Systems zu erhalten, multipliziert man die Wellenfunktionen der Zweiergruppen und antisymmetrisiert das Produkt.
Wie Seegmüller[1] zeigen konnte, ergibt ein solcher Gruppenansatz genau den Grundzustand eines Fermigases, wenn man der einzelnen Zweiergruppe folgende Form gibt :

$$\chi(1,2) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(x_1 - x_2)} \cdot \frac{\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2}{\sqrt{2}} \qquad (1)$$

wobei sich die Summation über alle Impulse innerhalb der Fermikugel erstreckt.
Abb.2 zeigt den Verlauf der Wellenfunktion einer solchen Gruppe.

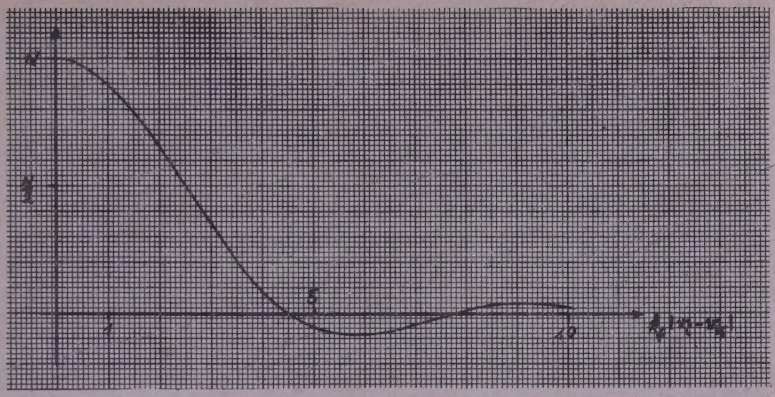

Abb. 2

Der Ortsanteil von $\chi(1,2)$ in graph. Darstellung

Man überzeugt sich leicht, daß man die Abstandswahrscheinlichkeiten von Abb.1 unmittelbar erhält, wenn man für ein Singulettpaar $|\chi|^2$ zum konstanten Untergrund addiert, für ein Triplettpaar $|\chi|^2$ vom Untergrund subtrahiert. Bei der Bildung der Abstandswahrscheinlichkeiten wird also die Zweiergruppe aus der Gesamtwellenfunktion wieder "herausgefiltert".

Wenn ein System von Fermionen mit Wechselwirkung vorliegt, kann man daran denken, den neuen Zustand wahlweise von der einen oder anderen Darstellung aus durch eine Näherungsrechnung zu finden.
Gehen wir aus von dem Ansatz mit ebenen Wellen, so zeigt sich, daß in der Schrödingerschen Störungsrechnung alle Glieder von der zweiten Näherung an divergieren. Dies rührt daher, daß für große Teilchenzahlen an der Fermioberfläche besetzte und unbesetzte Zustände beliebig dicht liegen, wir es also mit einem fast entarteten Problem zu tun haben.
Betrachtet man als Ausgangspunkt den Zweiergruppenansatz, so wird man sich vorstellen, daß sich unter dem Einfluß der Wechselwirkung die Gestalt der einzelnen Gruppe verändert. Bei anziehendem Potential wird die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des zweiten Teilchens in der Umgebung des ersten größer, bei abstoßenden Potential kleiner als im ungestörten Fall sein.

Für eine kleine Störung sollte diese Änderung auch nur klein sein. Wenn es gelingt, diese Abweichung in die Gruppe zu ziehen, indem man Impulse über der Fermigrenze einschließt, so kann man daraus die neue Gesamtwellenfunktion des gestörten Systems aufbauen. Da die Änderung jeder Gruppe klein sein soll, kann man hoffen, daß die Entwicklung der Gesamtwellenfunktion nach den Zusatztermen schnell konvergiert. Dann müßten die Energieerwartungswerte als Funktion dieser Terme anzugeben sein; ihr Minimum würde die gesuchte neue Wellenfunktion liefern.

Diese Argumentation ist freilich nicht zwingend. Man sieht dies folgendermaßen ein :
Man erhält auch dann noch exakt den Fermischen Grundzustand, wenn in der Gruppenfunktion (1) jeder Impuls mit einem Gewicht $f_{\vec{k}}$ behaftet wird,

$$\chi(1,2) = \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} \cdot \frac{\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2}{\sqrt{2}} \qquad (2)$$

wobei sich die Summation wie früher über alle Impulse innerhalb der Fermikugel erstreckt und wegen der Antisymmetrie-Forderung die zu entgegengesetzten Impulsen gehörenden Gewichte gleich sein müssen ($f_{\vec{k}} = f_{-\vec{k}}$). Nach Durchführung der Normierung bekommt man auch hieraus die Wellenfunktion des Fermischen Grundzustands.

Es zeigt sich aber, daß mit diesen nun ganz anders geformten Zweiergruppen die Abstandswahrscheinlichkeiten - die natürlich die gleichen wie vorher sind - nicht mehr aus konstantem Untergrund und aufgesetzter Gruppe dargestellt werden können. Dies geht also nur bei dem speziellen Ansatz (1).
Aus der Störungsrechnung für entartete Systeme ist bekannt, daß aus den verschiedenen Einzellösungen zu gleicher Energie erst geeignete Linearkombinationen gebildet werden müssen, aus denen bei aufgehobener Entartung die neuen Wellenfunktionen hervorwachsen. Diese Linearkombinationen zeichnen sich durch eine der Störung angepaßte Symmetrie gegenüber der ursprünglichen Lösungsmenge aus. Die Tatsache, daß man nur mit dem Ansatz (1) die Abstandswahrscheinlichkeiten in der

oben genannten einfachen Weise aufbauen kann, läßt deshalb hoffen, in ihm bereits die richtige Ausgangslösung gefunden zu haben. Trotzdem bleibt es natürlich zweifelhaft, ob man bei vorliegender Wechselwirkung überhaupt die Änderung der Abstandswahrscheinlichkeiten in die Zweiergruppe (1) ziehen kann.

Rein methodisch ergibt sich bei der Näherungsrechnung aber sofort die Schwierigkeit, daß die Entwicklung der Gesamtwellenfunktion nach den Zusatztermen bei großer Teilchenzahl nicht konvergiert. Deshalb sind sowohl das Normierungsintegral als auch die Energieintegrale divergent, sodaß sich die Erwartungswerte nicht mehr in geschlossener Form berechnen lassen.
Es müssen hier besondere Methoden entwickelt werden, die in den folgenden Abschnitten dargestellt werden sollen.

Die Behandlung des Zweiergruppenansatzes nach Nakamura

Den Ausgangspunkt unserer folgenden Betrachtungen bildet ein Verfahren, welches zuerst von Nakamura[2)] angewendet worden ist. Mit ihm lassen sich für einen allgemeinen Zweiergruppenansatz die Erwartungswerte eines Fermionensystems mit Wechselwirkung in geschlossener Form angeben. Die allgemeinste Zweiergruppe kann man durch Ansatz (2) darstellen, wenn über den ganzen Impulsraum summiert wird.

Bei der Berechnung der Erwartungswerte treten in großer Manigfaltigkeit sogenannte Clusterbildungen, d.h. innere Verknüpfungen mehrerer Zweiergruppen, auf. Die Wechselwirkungsenergie zwischen verschiedenen Clustern ist Null. Die innere Energie der einzelnen Cluster hängt von ihrer "Länge" ab, davon also, wieviele Gruppen verkettet sind. In einem Cluster der Länge 1

ist sie eine Funktion von f_k^{2l}, der dazugehörigen kinetischen Energie $\hbar k^2/2m$ und der Fouriertransformierten des Wechselwirkungspotentials.

Um die Gesamtenergie des Systems zu bestimmen, muß über die Energien aller möglichen Cluster summiert werden. Diese Summation ist bereits aus Fragestellungen der statistischen Mechanik bekannt (Mayer[3], Kahn und Uhlenbeck[4]). Cluster verschiedener Länge kommen mit unterschiedlicher Häufigkeit vor. Ihr statistisches Gewicht $\langle m_l \rangle$ läßt sich für große Teilchenzahlen N mit Hilfe der Sattelpunktsmethode angeben (Born und Fuchs[5]). Bei dieser Berechnung tritt ein Sattelpunktsparameter z auf, der durch die Teilchenzahl N und die Wahl der Koeffizienten f_k eindeutig bestimmt ist. $\langle m_l \rangle$ wird eine Funktion von f_k^{2l} und z^l.
Die Summation über alle möglichen Cluster reduziert sich jetzt auf eine Summe der inneren Energien von Clustern verschiedener Länge, multipliziert mit ihren statistischen Gewichten $\langle m_l \rangle$. Da die Länge l nur als Exponent von f_k^2 und z auftritt, erhält Nakamura so die Gesamtenergie als Potenzreihe von zf_k^2. Ist $zf_k^2 < 1$ für alle k, so lassen sich alle Potenzreihen zu einem endlichen Wert aufsummieren. Die Energieerwartungswerte sind damit als Funktion der f_k berechnet.
Um den Grundzustand eines Systems mit Wechselwirkung zu finden, muß eine Verteilung der f_k gesucht werden, welche die Gesamtenergie zum Minimum macht.
Nakamura konnte so die von Bardeen, Cooper, Schrieffer[6] und Bogoliubov[7] auf andere Weise hergeleiteten Gleichungen für den Grundzustand eines supraleitenden Systems erhalten.

In Nakamuras Darstellung scheint es zunächst, als wäre diese Methode für jeden Zweiergruppenansatz brauchbar. Eine genauere Betrachtung zeigt aber, daß man die Clustersummation nicht immer durchführen kann. Bei beliebiger Wahl der Koeffizienten f_k ist die Konvergenzbedingung für die Potenzreihen, $zf_k^2 < 1$, nicht für alle k erfüllt. Die Energieerwartungswerte werden in solchen Fällen unbestimmt. Damit ist natürlich die Brauchbarkeit dieser eleganten Methode beschränkt.

Trotzdem erweisen sich aber, wie wir zeigen werden, die Endresultate von Nakamura gültig für jeden Gruppenansatz. Um dies zu beweisen, müssen wir einen anderen Weg zur Bestimmung der Energieerwartungswerte wählen.

Überführung eines Gruppenansatzes in einen Determinantenansatz aus ebenen Wellen

Clusterintegrale treten immer dann auf, wenn in der Gesamtwellenfunktion unseres Systems die Zweiergruppen noch explizit enthalten sind. Wollen wir die Clusterbildung vermeiden - sie führt ja zu den oben erwähnten Schwierigkeiten - müssen wir die Zweiergruppen in der Wellenfunktion wieder "auflösen". Wir ändern damit natürlich nur die mathematische Struktur, die Wellenfunktion als Ganzes dürfen wir weiterhin als Zweiergruppenansatz betrachten.

Jede Vielteilchen-Wellenfunktion läßt sich in Form von Determinanten aus ebenen Wellen darstellen. Unserem Gruppenansatz wird deshalb ein bestimmter Determinanten-Ansatz äquivalent sein, mit dem keine Clusterbildungen auftreten können. Damit wollen wir die Erwartungswerte berechnen, um auf diese Weise die zu den problematischen Potenzreihen führenden Clustersummationen zu umgehen.

Die Transformation von Gruppen- in Determinantendarstellung führte Seegmüller durch :
Die antisymmetrisierte Wellenfunktion in Zweiergruppenansatz ist

$$\Psi = \sum_{(P)} (-1)^p \cdot P \left\{ \chi(1,2)\chi(3,4) \dots \chi(2N-1, 2N) \right\} \qquad (3)$$

Der Permutationsoperator P wirkt auf die Indizes der 2N Koordinaten; p ist seine Parität.

Hat die Gruppe χ die Struktur

$$\chi(1,2) = \sum_n \{ g_n(1)\, g_n'(2) - g_n'(1)\, g_n(2) \} \tag{4}$$

wobei g_n und g_n' beliebige Einteilchenfunktionen sind, dann ist

$$\Psi = 2^N \cdot N!\ \sum_{(\kappa)} D_{\gamma_1 \cdots \gamma_N} \tag{5}$$

$D_{\gamma_1 \cdots \gamma_N}$ ist die aus den Funktionen $g_{\gamma_1} g'_{\delta_1}, \ldots, g_{\gamma_N} g'_{\delta_N}$ gebildete Slaterdeterminante; $\sum_{(\kappa)}$ bedeutet eine Summation über alle Kombinationen der Indizes γ zu je N.

Nach dieser Vorschrift transformieren wir nun unseren Gruppenansatz. Es ist physikalisch sinnvoll, den Ortsanteil unserer Zweiergruppe χ nur als Funktion des Teilchenabstandes $r = |r_{ik}|$ anzusetzen. Die Fouriertransformierten f sind dann nur noch von $|\vec{k}|$ abhängig. Als Verallgemeinerung unseres Ansatzes (2) erhalten wir somit

$$\chi(1,2) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} f_k\, e^{i\vec{k}\vec{r}_{12}}\ \frac{\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2}{\sqrt{2}} \tag{6}$$

χ hat die Struktur (4), wenn wir

$$g = \frac{1}{\sqrt{2}\,\Omega} f_k\, e^{i\vec{k}\vec{r}_1}\,\alpha_1 \quad , \quad g' = e^{-i\vec{k}\vec{r}_2}\,\beta_2 \qquad \text{wählen.}$$

Unsere Determinanten aus (5) haben dann folgendes Aussehen :

$$D_{\gamma_1 \cdots \gamma_N} = \frac{f_{\gamma_1} \cdots f_{\gamma_N}}{(\sqrt{2}\,\Omega)^N} \begin{vmatrix} e^{i k_{\gamma_1} r_1}\alpha_1 & \cdots & e^{i k_{\gamma_1} r_{2N}}\alpha_{2N} \\ e^{-i k_{\gamma_1} r_1}\beta_1 & \cdots & e^{-i k_{\gamma_1} r_{2N}}\beta_{2N} \\ e^{i k_{\gamma_2} r_1}\alpha_1 & \cdots & e^{i k_{\gamma_2} r_{2N}}\alpha_{2N} \\ e^{-i k_{\gamma_2} r_1}\beta_1 & \cdots & e^{-i k_{\gamma_2} r_{2N}}\beta_{2N} \\ \vdots & & \vdots \\ e^{i k_{\gamma_N} r_1}\alpha_1 & \cdots & e^{i k_{\gamma_N} r_{2N}}\alpha_{2N} \\ e^{-i k_{\gamma_N} r_1}\beta_1 & \cdots & e^{-i k_{\gamma_N} r_{2N}}\beta_{2N} \end{vmatrix} \tag{7}$$

Zu jeder Funktion $e^{i k_\gamma r_\gamma \cdot \alpha}$ tritt auch gleichzeitig $e^{-i k_\gamma r_\gamma \cdot \beta}$ auf. Die Impuls- und Spinsumme ist also Null. Die einzelnen Determinanten sind orthogonal.

$$\langle D_{\gamma_1 \ldots \gamma_N} | D_{\gamma_1' \ldots \gamma_N'} \rangle = \frac{(2N)!}{2^N} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2 \cdot \delta_{\gamma_1 \gamma_1'} \cdots \delta_{\gamma_N \gamma_N'} \qquad (8)$$

Die Gesamtheit der D bilden natürlich kein vollständiges Basissystem, da sie nur einen Teil aller Slaterdeterminanten enthält, deren Impuls- und Spinsumme Null ist. Unser Zweiergruppenansatz baut deshalb - auch in seiner allgemeinsten Form - nur einen Unterraum des vollständigen Lösungsraumes auf. Man kann daraus jetzt schon folgendes aussagen :
Es wird vom speziellen Problem abhängen, wie gut der Gruppenansatz die exakte Lösung approximiert. Wenn die Wellenfunktion im wesentlichen in dem von uns erfaßten Teilraum liegt, werden wir gute Ergebnisse erzielen. Dies ist z.B. beim Fermischen Grundzustand der Fall. Die einzige Slaterdeterminante, die hierbei als Wellenfunktion auftritt, ist vom Typ (7).
Ebenso führt unser Ansatz für das Problem der Supraleitung - wie Nakamura zeigte - auf die von Bogoliubov angegebene Lösung. Dies ist nicht verwunderlich, da der Bogoliubov'sche Ansatz genau unserer Näherung entspricht. Dort sind im Grundzustand stets zwei Teilchen mit antiparallelen Impuls- und Spinrichtungen gekoppelt, ein Fall also, den der Zweiergruppenansatz völlig erfaßt.
Die Approximation wird immer schlechter werden, je mehr der in unserem Ansatz nicht enthaltene Teil der vollständigen Basis zur exakten Lösung beiträgt.

Berechnung der Erwartungswerte

Das Normierungsintegral unserer Gesamtwellenfunktion (5) läßt sich aus (8) sofort angeben :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = 2^N \cdot (N!)^2 (2N)! \sum_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2 \qquad (9)$$

Der Operator der kinetischen Energie ist

$$T = \sum_{i=1}^{2N} \frac{p_i^2}{2m}$$

Mit Hilfe der Gleichungen (5), (7) und (9) erhalten wir den Erwartungswert

$$E_{kin} = \frac{\langle \Psi | T | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\frac{\hbar^2}{2m} \cdot 2 \sum_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2 (k_{\gamma_1}^2 + \cdots + k_{\gamma_N}^2)}{\sum_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2}$$

Die Summe $\sum_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2 (k_{\gamma_1}^2 + \cdots + k_{\gamma_N}^2)$ können wir umformen. Wir wissen, daß zu jedem k_α^2 im Produkt der f^2 ein Faktor f_α^2 auftritt. Umgekehrt gehört zu jeder Kombination $(\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_N)$, die α enthält, der Faktor k_α^2. Alle Kombinationen zu je N, die α enthalten, bekommt man aber folgendermaßen :
Man nehme alle Kombinationen zu je (N-1), die α nicht enthalten und füge zu jeder α hinzu. Mit diesem Rezept wird

$$\sum_{\alpha \in K}{}_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2 = f_\alpha^2 \sum_{\alpha \notin K}{}_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_{N-1}}^2$$

und

$$\sum_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_N}^2 (k_{\gamma_1}^2 + \cdots k_{\gamma_N}^2) = \sum_\alpha k_\alpha^2 f_\alpha^2 \sum_{\alpha \notin K}{}_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_{N-1}}^2$$

Bezeichnen wir noch zur Abkürzung

$$\sum_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_\ell}^2 = {}_{\alpha\beta} Q_\ell \; ; \quad \sum_{\alpha,\beta,\ldots \notin K}{}_{(K)} f_{\gamma_1}^2 \cdots f_{\gamma_\ell}^2 = Q_\ell^{\alpha,\beta,\ldots} \qquad (10)$$

so wird

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{m} \sum_\alpha k_\alpha^2 \cdot \frac{f_\alpha^2 Q_{N-1}^\alpha}{Q_N} \qquad (11)$$

Wie im Anhang gezeigt wird, läßt sich mit Hilfe der Sattelpunktsmethode der Quotient Q^{α}_{N-1} / Q_N berechnen.

$$\frac{Q^{\alpha}_{N-1}}{Q_N} = \frac{z}{1 + z f_\alpha^2} \tag{12}$$

wobei z bestimmt wird durch die Gleichung

$$\sum_\alpha \frac{z f_\alpha^2}{1 + z f_\alpha^2} = N \tag{13}$$

Der Erwartungswert der kinetischen Energie ist also in seiner endgültigen Form wie bei Nakamura

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{m} \sum_\alpha k_\alpha^2 \frac{z f_\alpha^2}{1 + z f_\alpha^2} \tag{14}$$

Die Abstandsfunktion zweier Teilchen ist spinabhängig; sie ergibt sich für Teilchen mit parallelen bzw. antiparallelen Spin zu

$$w_{12}^{3,1} = \frac{\langle \Psi | \vec{W}_{12}^{3,1} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

$$\vec{W}_{ik}^{\,1} = \frac{1}{4} \left(1 - \vec{\sigma}(i)\vec{\sigma}(k)\right) \frac{1}{dr_i\, dr_k} \tag{15}$$

$$\vec{W}_{ik}^{\,3} = \frac{1}{4} \left(3 + \vec{\sigma}(i)\vec{\sigma}(k)\right) \frac{1}{dr_i\, dr_k}$$

$\vec{\sigma}$ ist ein dreidimensionaler Vektor, dessen Komponenten die Paulischen Spinmatrizen sind.
W^1 und W^3 sind Projektionsoperatoren für Spinsingulett- und Spintriplettzustände. Sie sorgen außerdem dafür, daß bei der Bildung der Matrixelemente nicht über die Ortskoordinaten der Teilchen i und k integriert wird.

Setzen wir in (15) unsere Wellenfunktion Ψ ein, so erhalten wir :

$$w_{12}^{3,1} = \frac{1}{Q_N} \sum_{(K)} \sum_{(K')} \langle D_{\gamma_1 \dots \gamma_N} | \vec{W}_{12}^{3,1} | D_{\gamma_1' \dots \gamma_N'} \rangle \tag{16}$$

Da $W^{3,1}$ nur auf zwei Teilchen wirkt, ist $\langle D|\vec{W}^{3,1}|D'\rangle$ nur dann von Null verschieden, wenn sich die beiden Slaterdeterminanten in höchstens zwei Einteilchenfunktionen unterscheiden. Wegen des speziellen Aufbaus der Determinanten (7) gibt es aber keine, die sich nur in einer Einteilchenfunktion unterscheiden. Beiträge liefern also nur die beiden Typen von Matrixelementen

$$\langle D_{\gamma_1 \dots \gamma_N}|\vec{W}^{3,1}|D_{\gamma_1 \dots \gamma_N}\rangle \quad ; \quad \langle D_{\gamma_1 \dots \gamma_N}|\vec{W}^{3,1}|D_{\gamma_1' \gamma_2 \dots \gamma_N}\rangle$$

(Der Index γ_1' bestimmt 2 Zeilen der Determinante)

Das diagonale Matrixelement ist

$$\langle D_{\gamma_1 \dots \gamma_N}|\vec{W}_{12}^{3,1}|D_{\gamma_1 \dots \gamma_N}\rangle =$$

$$= \frac{(2N-2)!}{2^N \Omega^2} f_{\gamma_1}^2 \dots f_{\gamma_N}^2 \cdot \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} \begin{vmatrix} e^{ik_i x_1} s_{s_i}^{i} & e^{ik_i x_2} s_{s_i}^{i} \\ e^{ik_j x_1} s_{s_j}^{j} & e^{ik_j x_2} s_{s_j}^{j} \end{vmatrix}^{*} \frac{1}{4}\left(3 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2\right) \begin{vmatrix} \cdots & \\ \cdots & \end{vmatrix}$$

$$= \frac{(2N-2)!}{2^N \Omega^2} f_{\gamma_1}^2 \dots f_{\gamma_N}^2 \cdot \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} (1 \pm \delta_{s_i s_j})\left(1 \mp \frac{1}{2}\left(e^{i(k_i - k_j)x_{12}} + e^{-i(k_i - k_j)x_{12}}\right)\right)$$

Hierbei wird über alle Impulse k_i und k_j der Determinante (7) summiert, also über 2N Impulse.
Da aber zu jeder Funktion $e^{ik_\alpha x} \cdot \alpha$ auch $e^{-ik_\alpha x} \cdot \beta$ auftritt, können wir die Doppelsumme so umschreiben, daß jeweils nur "positive" Impulse k_α und k_β vorkommen und wir demnach nur über N Impulse aufsummieren müssen.

$$\sum_{\substack{i,j \\ (i \neq j)}} (1 \pm \delta_{s_i s_j})\left(1 \mp \frac{1}{2}\left(e^{i(k_i - k_j)x_{12}} + e^{-i(k_i - k_j)x_{12}}\right)\right) =$$

$$= 2N(2N-1) \pm 2N(N-1) \mp \sum_\alpha \left(e^{2ik_\alpha x_{12}} + e^{-2ik_\alpha x_{12}}\right)$$
$$\mp \sum_{\substack{\alpha,\beta \\ (\alpha \neq \beta)}} \left(e^{i(k_\alpha + k_\beta)x_{12}} + e^{-i(k_\alpha + k_\beta)x_{12}}\right)$$
$$-(1 \pm 1) \sum_{\substack{\alpha,\beta \\ (\alpha \neq \beta)}} \left(e^{i(k_\alpha - k_\beta)x_{12}} + e^{-i(k_\alpha - k_\beta)x_{12}}\right)$$

Die Berechnung des nichtdiagonalen Matrixelementes ergibt :

$$\langle D_{\alpha,\gamma_2,\dots\gamma_N}|\vec{W}_{12}^{3,1}|D_{\beta,\gamma_2,\dots\gamma_N}\rangle =$$

$$= \frac{(2N-2)!}{2^N \Omega^2} f_\alpha f_\beta f_{\gamma_2}^2 \dots f_{\gamma_N}^2 \cdot \frac{1}{2}\left\{e^{i(k_\alpha - k_\beta)x_{12}} + e^{-i(k_\alpha - k_\beta)x_{12}} \mp \left(e^{i(k_\alpha + k_\beta)x_{12}} + e^{-i(k_\alpha + k_\beta)x_{12}}\right)\right\}$$

Um daraus die Abstandswahrscheinlichkeiten zu gewinnen, müssen wir gemäß (16) über alle Kombinationen (K) aufsummieren.
Der Beitrag der Diagonalelemente zur Summe ist

$$w_D^{3,1} = \frac{(2N-2)!}{(2N)!\Omega^2}\Big\{N(2N\pm N-(1\pm1)\mp\frac{1}{Q_N}\sum_{(K)} f_{\beta_1}^2\cdots f_{\beta N}^2\cdot \cdot\Big[\sum_{\alpha\in K} e^{2ik_\alpha r_{12}} + (2\pm1)\sum_{\substack{\alpha\neq\beta\\ \alpha,\beta\in K}} e^{i(k_\alpha-k_\beta)r_{12}}\Big]\Big\}$$

Wie bei der Berechnung der kinetischen Energie können wir die Summe über alle Kombinationen (K) wieder umformen. Mit den in (10) definierten Abkürzungen wird

$$w_D^{3,1} = \frac{(2N-2)!}{(2N)!\Omega^2}\Big\{N(2N\pm N-(1\pm1)\mp\sum_\alpha f_\alpha^2\frac{Q_{N-1}^{\alpha}}{Q_N} e^{2ik_\alpha r_{12}} \mp(2\pm1)\sum_{\alpha,\beta} f_\alpha^2 f_\beta^2\frac{Q_{N-2}^{\alpha,\beta}}{Q_N} e^{i(k_\alpha-k_\beta)r_{12}}\Big\}$$

Die nichtdiagonalen Matrixelemente liefern nur im Singulettzustand einen Beitrag :

$$w_{ND}^{3} = 0$$

$$w_{ND}^{1} = \frac{(2N-2)!}{(2N)!\Omega^2}\cdot 2\sum_{\alpha\neq\beta}\frac{Q_{N-1}^{\alpha,\beta}}{Q_N} f_\alpha f_\beta e^{i(k_\alpha-k_\beta)r_{12}}$$

Wie im Anhang gezeigt wird, gilt nun für große N :

$$Q_{N-1}^{\alpha,\beta} = Q_N\cdot\frac{z}{(1+zf_\alpha^2)(1+zf_\beta^2)}$$

$$Q_{N-2}^{\alpha,\beta} = Q_N\cdot\frac{z^2}{(1+zf_\alpha^2)(1+zf_\beta^2)} \qquad (17)$$

Für große Teilchenzahlen können wir aber N und Σ_α gegen N^2 und $\Sigma_{\alpha,\beta}$ vernachlässigen.
Die Abstandswahrscheinlichkeit w_{12} zweier Teilchen, unabhängig von ihrer Spinstellung, bekommen wir durch Addition von w_{12}^3 und w_{12}^1. Fassen wir die diagonalen und nichtdiagonalen Anteile zusammen, so ist

$$w_{12}^{3} = \frac{1}{4N^2}\frac{3}{\Omega^2}\Big[N^2-\sum_{\alpha,\beta}\frac{1}{1+1/2f_\alpha^2}\frac{1}{1+1/2f_\beta^2}e^{i(k_\alpha-k_\beta)r_{12}}\Big]$$

$$w_{12}^{1} = \frac{1}{4N^2}\frac{1}{\Omega^2}\Big[N^2+\sum_{\alpha,\beta}\frac{1}{1+1/2f_\alpha^2}\frac{1}{1+1/2f_\beta^2}\Big(1+\frac{2}{2f_\alpha f_\beta}\Big)e^{i(k_\alpha-k_\beta)r_{12}}\Big] \qquad (18)$$

$$w_{12} = \frac{1}{N^2}\frac{1}{\Omega^2}\Big[N^2-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\frac{1}{1+1/2f_\alpha^2}\frac{1}{1+1/2f_\beta^2}\Big(1-\frac{1}{2f_\alpha f_\beta}\Big)e^{i(k_\alpha-k_\beta)r_{12}}\Big]$$

Eine Berechnung der Abstandswahrscheinlichkeiten findet sich bei Nakamura nicht. Wir werden diese zur Diskussion der Grundzustandsenergien verwenden.

Den Erwartungswert der potentiellen Energie können wir sofort aus den Abstandswahrscheinlichkeiten berechnen, wenn der Wechselwirkungsoperator V ein mit der Gesamtwellenfunktion vertauschbarer Zweiteilchenoperator ist.

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,\kappa} V(r_{i\kappa})$$

$$E_{pot} = \frac{\langle \Psi | V | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{1}{2} \sum_{i,\kappa} \int w_{i\kappa} V_{i\kappa} \, dx_i \, dx_\kappa \qquad (19)$$

$$= \binom{2N}{2} \int w_{12} V_{12} \, dx_1 \, dx_2$$

Sind $v(k)$ die Fouriertransformierten des Zweiteilchenpotentials, entsteht aus (19) :

$$E_{pot} = \binom{2N}{2} v(0) - \sum_{\alpha,\beta} \frac{1}{1+1/2 f_\alpha^2} \cdot \frac{1}{1+1/2 f_\beta^2} \left(1 - \frac{1}{2 f_\alpha f_\beta}\right) v(k_\alpha - k_\beta) \qquad (20)$$

Dieser Ausdruck stimmt wieder mit dem von Nakamura errechneten Wert überein.

Wir können aber über Nakamura hinaus auch für spinabhängige Wechselwirkung den Energieerwartungswert angeben. Dazu brauchen wir nur in (19) die spinabhängigen Abstandswahrscheinlichkeiten einsetzen.

Dieser von uns eingeschlagene Weg zur Berechnung der Erwartungswerte scheint uns besser, da er die bei Nakamura anfechtbaren Schritte - die Clustersummationen - vermeidet. Zusätzlich können wir damit die Abstandswahrscheinlichkeiten berechnen und eine spinabhängige Wechselwirkung erfassen.
Ein weiterer Vorteil liegt darin, daß unser Formalismus für Systeme aus zwei Fermionensorten verallgemeinert werden kann. Dies soll im übernächsten Abschnitt geschehen.

Der Grundzustand von Systemen mit spinunabhängiger Wechselwirkung

Wir wollen in diesem Abschnitt Anwendungsmöglichkeiten und Grenzen des Zweiergruppenansatzes diskutieren. Die folgenden Überlegungen stehen im engen Zusammenhang mit der BCS-Theorie[6], sie gehen jedoch in einigen Punkten darüber hinaus.

Definieren wir

$$h_k = \frac{1}{1 + 1/2 f_k^2} \qquad (h_k \leq 1) \tag{21}$$

so folgt aus (13), (14) und (20) :

$$\begin{aligned} N &= \Sigma_k \, h_k \\ E_{kin} &= 2\Sigma_k \, \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \, h_k \\ E_{pot} &= \binom{2N}{2} v_0 - \Sigma_{kk'} v_{kk'} h_k h_{k'} + \Sigma_{kk'} v_{kk'} \sqrt{h_k (1-h_k) h_{k'} (1-h_{k'})} \end{aligned} \tag{22}$$

Aus der Gesamtenergie wollen wir durch ein Variationsverfahren die Verteilungsfunktion der h_k bestimmen.

Die potentielle Energie setzt sich aus drei Teilen zusammen :
Neben der Konstanten $\binom{2N}{2} v_0$ stehen die diagonalen Anteile $-\Sigma_{kk'} v_{kk'} h_k h_{k'}$ und die nichtdiagonalen Glieder $\Sigma_{kk'} v_{kk'} \sqrt{h_k (1-h_k) h_{k'} (1-h_{k'})}$. Wäre $v_{kk'}$ konstant, so würden auch die Diagonal- oder Selbstenergieterme für jede beliebige Wahl der h_k nur einen konstanten Beitrag zur potentiellen Energie liefern. Sie sind aber auch dann noch nahezu konstant, wenn $v_{kk'}$ keine stark veränderliche Funktion ist und die Verteilungsfunktion nur wenig vom Fermischen Grundzustand abweicht. Wir werden sie deshalb bei der Variation gegenüber dem stark veränderlichen nichtdiagonalen Anteil vernachlässigen. Für eine genauere Rechnung kann ihr Beitrag durch eine geeignete Renormalisierung der kinetischen Energiezustände berücksichtigt werden.

Wählen wir als Energienullpunkt den Fermischen Grundzustand, so ist die Gesamtenergie

$$E = 2\sum_{k>k_f} \varepsilon_k h_k - 2\sum_{k\le k_f} \varepsilon_k (1-h_k) + \sum_{kk'} v_{kk'} \sqrt{h_k(1-h_k)h_{k'}(1-h_{k'})} \qquad (23)$$

Die kinetischen Energien ε_k sind dabei gezüglich der Fermienergie E_f gemessen. Abgesehen fon der Renormalisierung ist also

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad (24)$$

Wir suchen nun das Minimum von E bezüglich h_k unter Berücksichtigung der Nebenbedingung $\sum_k h_k = N$.

Dazu muß das Integralgleichungssystem $\frac{\partial}{\partial h_k}(E - 2\lambda N) = 0$ gelöst werden.

$$E - 2\lambda N = 2\sum_{k>k_f} \varepsilon_k h_k - 2\sum_{k\le k_f} \varepsilon_k (1-h_k) - 2\lambda \sum_k h_k + \sum_{kk'} v_{kk'} \sqrt{h_k(1-h_k)h_{k'}(1-h_{k'})}$$

Durch partielle Differentiation nach h_k entsteht daraus

$$2(\varepsilon_k - \lambda)\sqrt{h_k(1-h_k)} + (1-2h_k)\sum_{k'} v_{kk'} \sqrt{h_{k'}(1-h_{k'})} = 0 \qquad (25)$$

Um eine Lösung dieser Gleichung zu finden, setzen wir

$$C_k = \sum_{k'} v_{kk'} \sqrt{h_{k'}(1-h_{k'})} \qquad (26)$$

und lösen (25) nach h_k auf .

$$h_k = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k-\lambda)^2 + C_k^2}}\right\} \qquad (27)$$

Für $C_k = 0$, also für verschwindende Wechselwirkung, geht diese Lösung in den Fermischen Grundzustand über.

Die Verteilungsfunktion ist damit natürlich nur implizit gegeben, da C_k selbst Funktion von h_k ist. Ihre explizite Form können wir in einem Iterationsverfahren bestimmen:

Weicht die Verteilungsfunktion h_k nur wenig vom Fermischen Grundzustand ab, so ist $\sqrt{h_k(1-h_k)}$ nur nahe der Fermigrenze von Null verschieden. Aus Gleichung (26) sehen wir dann, daß C_k dort seinen maximalen Wert annehmen wird. Wir ersetzen deshalb als ersten Iterationsschritt C_k durch C_{k_f}.

$$C_k = C_{k_f} = \varepsilon_o \qquad \text{für alle } k \tag{28}$$

Dann wird

$$h_k = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_k-\lambda)^2 + \varepsilon_o^2}}\right\} \tag{29}$$

Den Lagrange'schen Parameter λ können wir aus der Nebenbedingung $\sum_k h_k = N$ als Funktion von ε_o ermitteln. Die Integration liefert als Bestimmungsgleichung für λ :

$$0 = \frac{1}{E_f^{3/2}}\left((E_f+\lambda)^2+\varepsilon_o^2\right)^{1/4}\left\{(E_f+\lambda)\boldsymbol{E}(\varrho) + \left(\sqrt{(E_f+\lambda)^2+\varepsilon_o^2} - (E_f+\lambda)\frac{\boldsymbol{K}(\varrho)}{2}\right\} - 1$$

$$\varrho = \left(\frac{1}{2} + \frac{E_f+\lambda}{2\sqrt{(E_f+\lambda)^2+\varepsilon_o^2}}\right)^{1/2}$$

$\boldsymbol{K}$ und $\boldsymbol{E}$ sind die vollständigen elliptischen Integrale 1. und 2. Gattung.
Die Abhängigkeit des Parameters λ von ε_o ist in Abb.3 dargestellt.

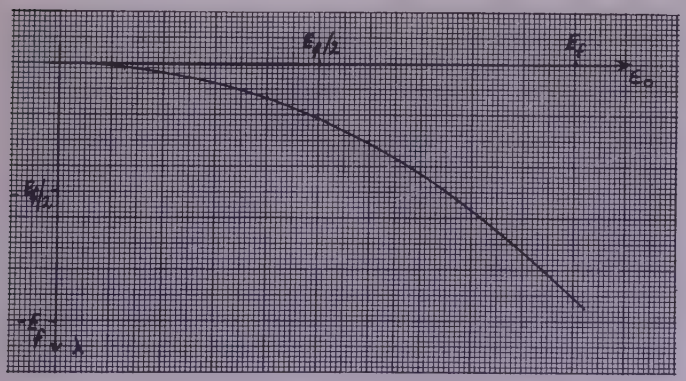

Abb. 3

λ als Funktion von ε_o

h_k wird damit also eine Funktion von ε_o . In Abb.4 ist der Verlauf der Verteilungsfunktion aufgetragen.

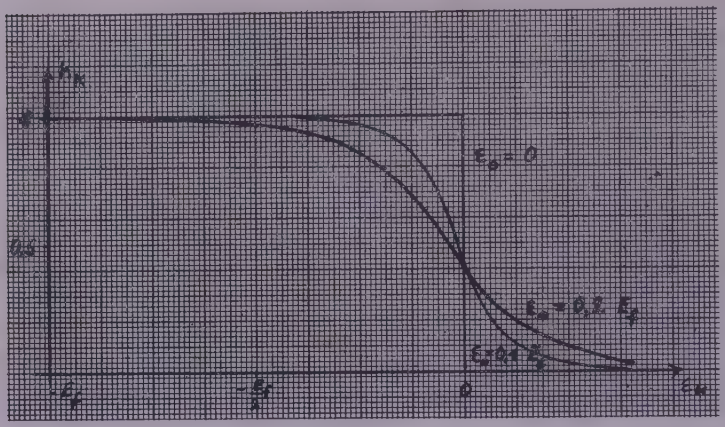

Abb. 4

Die Verteilungsfunktion h_k für einige Werte von ε_o

Zur Bestimmung von ε_o setzen wir (28) und (29) in (26) ein und erhalten

$$C_{k_f} = \frac{1}{2} \sum_{k'} \nu_{k_f k'} \frac{\varepsilon_o}{\sqrt{(\varepsilon_{k'} - \lambda)^2 + \varepsilon_o^2}} = \varepsilon_o \qquad (30)$$

Da λ als Funktion von ε_o bekannt ist, bestimmt diese Gleichung eine eindeutige Lösung von ε_o .

Mit der so ermittelten Verteilungsfunktion h_k können wir jetzt aus (26) alle anderen C_k berechnen und durch Einsetzen in (27) eine verbesserte Verteilungsfunktion h_k aufstellen. Damit wird nun der Zyklus wiederholt, bis wir die gewünschte Genauigkeit erreicht haben.

In dem Bereich, wo $\nu_{kk'}$ sich nur wenig von $\nu_{k_f k'}$ unterscheidet, ist unser Iterationsansatz (C_k = const) gut erfüllt. Falls dieser Bereich groß gegen ε_o ist, wird also bereits die erste Näherung (29) - bis auf das asymptotische Verhalten - die richtige Verteilungsfunktion wiedergeben. Wir begehen sicher keinen großen Fehler, wenn wir außerhalb dieses Bereichs unsere Ver-

teilungsfunktion der des Fermischen Grundzustandes gleichsetzen.
Statt $\nu_{kk'}$ nehmen wir den Mittelwert $\langle\nu\rangle$ und erhalten dann aus (26) :

$$\varepsilon_0 = \langle\nu\rangle \sum_{k'} \sqrt{h_{k'}(1-h_{k'})}$$

Diese Näherungslösung verwenden Bardeen, Cooper und Schrieffer zur Berechnung des Grundzustandes eines supraleitenden Systems.

Wir haben bisher noch nicht darauf geachtet, ob dieses Variationsverfahren wirklich einen energetisch tieferen Zustand als den Fermischen Grundzustand ergibt. Da bei Abänderung des Fermischen Grundzustandes die kinetische Energie stets ansteigt, muß die potentielle Energie stärker negativ werden, um eine insgesamt negative Gesamtenergie zu erzeugen. Wie wir aus (23) sehen, ist dies nur für eine im Mittel negative - also anziehende - Wechselwirkung $\nu_{kk'}$ möglich.
Für eine abstoßende Wechselwirkung ist also im Rahmen unseres Modells der Fermische Grundzustand der energetisch günstigste Zustand.

Dies können wir auch noch auf andere Weise einsehen : Betrachten wir die Abstandswahrscheinlichkeiten w_{12} für kleine r, so erhalten wir aus (18) :

$$\begin{aligned} w_{12}(r\to 0) &= \frac{1}{\Omega^2}\left\{1 - \frac{1}{2N^2}\left(\sum_k h_k\right)^2 + \frac{1}{2N^2}\left(\sum_k \sqrt{h_k(1-h_k)}\right)^2\right\} \\ &= \frac{1}{\Omega^2}\left\{\frac{1}{2} + \frac{1}{2N^2}\left(\sum_k \sqrt{h_k(1-h_k)}\right)^2\right\} \end{aligned} \qquad (31)$$

Da der zweite Summand stets positiv ist, können wir in unmittelbarer Nähe eines Teilchens keine Abnahme der Wahrscheinlichkeit bewirken, ein zweites Teilchen dort zu finden - gleichgültig, wie wir auch den Fermischen Grundzustand abändern.
Bei einer abstoßenden Wechselwirkung muß aber die Aufenthaltswahrscheinlichkeit abnehmen. Unser Gruppenansatz kann demnach diesen Fall nicht beschreiben. Genau umgekehrt ist es bei anziehendem Potential. Hier steigt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit an und genau dieses Verhalten zeigen alle Lösungen.

Wie gut freilich der von uns gefundene günstigste Gruppenansatz mit der wirklichen Wellenfunktion übereinstimmt, wird von der speziellen Form der Wechselwirkung abhängen.

Die Verallgemeinerung des Zweiergruppenansatzes für Kernmaterie

Wir wollen nun versuchen, unsere Rechnungen auf zusammengesetzte Systeme aus zwei verschiedenen Fermionenarten auszudehnen. Der Prototyp dafür ist die Kernmaterie, ein System aus Protonen und Neutronen. Im Weiteren sprechen wir nur noch von diesen beiden Teilchen.

Wir sehen Neutronen und Protonen nicht als zwei - ihrem Wesen nach - verschiedene Teilchen an, sondern als zwei Zustände eines einzigen Teilchens, des Nukleons. Die beiden Zustände kennzeichnen wir durch die zwei möglichen Werte ihrer Isospinkoordinate π und ν Die Gesamtwellenfunktion muß bei Vertauschung aller Koordinaten von zwei Teilchen - des Ortes, des Spins und des Isospins - antisymmetrisch sein.

Die naheliegenste Verallgemeinerung des Gruppenansatzes wäre es, Vierergruppen aus zwei Protonen und zwei Neutronen mit jeweils entgegengerichteten Spinstellungen zu bilden. Mit diesen Vierergruppen - sie sind nichts anderes als α-Teilchen - müßten wir einen ähnlichen Formalismus wie oben entwickeln, um die Erwartungswerte des Nukleonensystems zu berechnen. Dies führt aber zu großen mathematischen Schwierigkeiten.

Versuchen wir andrerseits, das System aus Zweiergruppen aufzubauen, so können wir die Nukleonen nicht zu gleichartigen Gruppen zusammenfügen. Damit die Wellenfunktion einer Gruppe antisymmetrisch wird, muß bei symmetrischer Orts- und antisymmetrischer Spinfunktion die Isospinfunktion symmetrisch sein. Dafür gibt es

aber drei Möglichkeiten.
Das Problem wird noch schwieriger, wenn wir nicht voraussetzen, daß das System gleichviel Protonen und Neutronen enthält.

Als Ausweg bietet sich nun die Möglichkeit an, ganz auf den expliziten Gruppenansatz zu verzichten und dafür die Determinantendarstellung (5) zu verallgemeinern.

Das Nukleonensystem umfasse 2M Protonen und 2N Neutronen. Zu den ebenen Wellen in der Determinante (7) fügen wir noch die Isospinkoordinate hinzu. Dabei sollen in jeder Determinante je zwei Protonen- bzw. Neutronenzustände mit entgegengesetztem Impuls und Spin auftreten. Explizit hat sie also folgendes Aussehen :

$$D_{MN} = D_{\gamma_1 \ldots \gamma_M ; \gamma_1' \ldots \gamma_N'} = \frac{\prod_{\mu=1}^{M} \beta_{1\mu} \prod_{\nu=1}^{N} \beta_{1\nu}'}{(\sqrt{\Omega})^{M+N}} \begin{vmatrix} e^{ik_{\beta_1} x_1} \alpha_1 \pi_1 & e^{ik_{\beta_1} x_2} \alpha_2 \pi_2 & \cdots \\ e^{-ik_{\beta_1} x_1} \beta_1 \pi_1 & e^{-ik_{\beta_1} x_2} \beta_2 \pi_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \\ e^{ik_{\beta_1'} x_1} \alpha_1 \nu_1 & e^{ik_{\beta_1'} x_2} \alpha_2 \nu_2 & \cdots \\ e^{-ik_{\beta_1'} x_1} \beta_1 \nu_1 & e^{-ik_{\beta_1'} x_2} \beta_2 \nu_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \end{vmatrix} \qquad (32)$$

Die ungestrichenen Größen beziehen sich auf Protonen, die gestrichenen auf Neutronen.

Aus diesen Determinanten bauen wir unsere Gesamtwellenfunktion auf :

$$\Psi = \sum_{(K)} \sum_{(K')} D_{\gamma_1 \ldots \gamma_M ; \gamma_1' \ldots \gamma_N'} \qquad (33)$$

Da die Determinanten wieder orthogonal sind, können wir sofort das Normierungsintegral angeben :

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \frac{(2M+2N)!}{2^{M+N}} \sum_{(K)} \sum_{(K')} \beta_{\gamma_1}^2 \cdots \beta_{\gamma_M}^2 \beta_{\gamma_1'}^2 \cdots \beta_{\gamma_N'}^2 = \frac{(2M+2N)!}{2^{M+N}} G_M G_N \qquad (34)$$

Die Abstandswahrscheinlichkeiten zweier Nukleonen sind jetzt von ihrem Spin- und Isospinzustand abhängig. Bezeichnen wir mit 3,1 die Spin- und mit S,T die entsprechenden Isospinzustände, so erhalten unsere in (15) definierten Projektionsoperatoren W folgende Form :

$$\vec{W}_{ik}^{1S} = \frac{1}{16}(1-\vec{\sigma}_i\vec{\sigma}_k)(1-\vec{\tau}_i\vec{\tau}_k)\frac{1}{d\vec{w}_i d\vec{w}_k} \qquad W_{ik}^{1T} = \ldots (3+\vec{\tau}_i\vec{\tau}_k)\ldots$$

$$W_{ik}^{3S} = \frac{1}{16}(3+\vec{\sigma}_i\vec{\sigma}_k)(1-\vec{\tau}_i\vec{\tau}_k)\frac{1}{d\vec{w}_i d\vec{w}_k} \qquad W_{ik}^{3T} = \ldots (3+\vec{\tau}_i\vec{\tau}_k)\ldots \qquad (35)$$

$\vec{\tau}$ sind die den $\vec{\sigma}$ äquivalenten Vektoren im Isospinraum.

Alle Überlegungen, die wir zuvor für einfache Systeme durchgeführt haben, lassen sich sinngemäß auf das Nukleonensystem übertragen.
Wir erhalten als Ergebnis der analogen Rechnung .

$$w_{12}^{1S,3S} = \frac{2\mp1}{4(M+N)^2\Omega^2}\left[MN \mp \sum_{\alpha,\beta}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta'^2}\, e^{i(k_\alpha-k_\beta)x_{12}}\right]$$

$$w_{12}^{1T,3T} = \frac{2\mp1}{4(M+N)^2\Omega^2}\Big[M^2+N^2+MN \pm \sum_{\alpha,\beta}\Big(\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta^2} + \frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha'^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta'^2} + \frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta'^2} + \frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha'^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta^2}\Big)e^{i(k_\alpha-k_\beta)x_{12}} + (1\pm1)\sum_{\alpha,\beta}\Big(\frac{1}{2f_\alpha f_\beta}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta^2} + \frac{1}{2f_\alpha' f_\beta'}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha'^2}\frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\beta'^2}\Big)e^{i(k_\alpha-k_\beta)x_{12}}\Big] \qquad (36)$$

z und z' bestimmen sich dabei aus den beiden Gleichungen

$$\sum_\alpha \frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha^2} = M \qquad \sum_\alpha \frac{1}{1+\frac{1}{2}f_\alpha'^2} = N$$

Die nichtdiagonalen Matrixelemente liefern nur einen Beitrag zu w_{12}^{1T}. Sie ergeben dort die zweite Summe.

Im Grenzfall M oder N gegen Null gehen die Abstandswahrscheinlichkeiten in die für einfache Systeme gefundenen Ausdrücke (18) über.

Im Fermischen Grundzustand erfüllen die Impulse der Protonen und Neutronen je eine Fermikugel mit den Radien k_f und k_f'. Die Abstandswahrscheinlichkeiten sind für diesen Fall in Abb.5 dargestellt. Die Isospinsingulettzustände sinken ab, wenn nicht gleichviel Protonen und Neutronen im System enthalten sind; die Isospintriplettzustände steigen an.

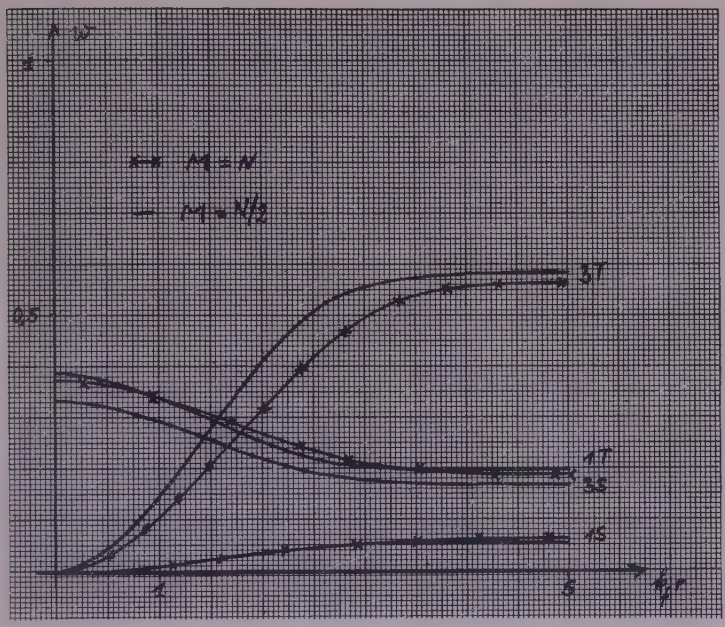

Abb. 5

Abstandswahrscheinlichkeiten im Fermischen Grundzustand

Der Erwartungswert der kinetischen Energie setzt sich aus den beiden Anteilen von Protonen und Neutronen getrennt zusammen

$$E_{kin} = \frac{\hbar^2}{m}\left\{\sum_\alpha \frac{k_\alpha^2}{1+1/2 f_\alpha^2} + \sum_\alpha \frac{k_\alpha^2}{1+1/2' f_\alpha'^2}\right\} \qquad (37)$$

wie sich auch durch eine kurze Rechnung leicht bestätigen läßt.

Die potentielle Energie können wir nach (19) aus den Nukleonenpotentialen und den zugehörigen Abstandswahrscheinlichkeiten angeben. Dies ist freilich wiederum nur dann möglich, wenn der Wechselwirkungsoperator mit der Gesamtwellenfunktion vertauschbar ist.
Bei der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung treten aber als wesentliche Anteile zwei Wechselwirkungstypen auf, die diese Eigenschaft nicht besitzen. Es sind dies die Tensor und die Spin-Bahn-Kopplung. Für diese beiden Fälle müssen wir die Energieerwartungswerte gesondert berechnen.

Betrachten wir zunächst die tensorielle Wechselwirkung :
Der Tensoroperator hat die Form

$$\mathcal{H}_{ik} = \frac{3}{r_{ik}^2}(\vec{\sigma}_i \vec{r}_{ik})(\vec{\sigma}_k \vec{r}_{ik}) - (\vec{\sigma}_i \vec{\sigma}_k)$$

Für Spinsingulettzustände ($\vec{\sigma}_i = -\vec{\sigma}_k$) ist $\mathcal{H}_{ik}$ Null; für die Spintriplettzustände berechnen wir nun die Wahrscheinlichkeitsdichten

$$t w^{3S\,3T} = \frac{\langle \Psi | \mathcal{H} \vec{W}^{3S,3T} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

Es zeigt sich, daß nur die nichtdiagonalen Anteile von $t w^{3T}$ von Null verschieden sind.

$$t w_{12}^{3T} = \frac{1}{2(M+N)^2} \cdot \frac{1 - 3\zeta^2/r_{12}^2}{\Omega^2} \cdot \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{1/2 f_\alpha f_\beta}{(1+1/2 f_\alpha^2)(1+1/2 f_\beta^2)} + \frac{1/2 f_\alpha' f_\beta'}{(1+1/2 f_\alpha'^2)(1+1/2 f_\beta'^2)} \right) e^{i(k_\alpha - k_\beta) r_{12}}$$

(ζ ist die Komponente von r_{12} in der Quantisierungsachse unseres Nukleonensystems)

Da – wie vorausgesetzt – f nur von $|\vec{k}|$ abhängt, ist die Summe nur eine Funktion des Abstandes r.
Die tensorielle Wahrscheinlichkeitsdichte hat also die Form

$$t w^{3T} = \frac{1}{2(M+N)^2} \left(1 - \frac{3\zeta^2}{r^2}\right) F(r)$$

Der zugehörige Energieanteil ist nach (19)

$$E_{pot}^{tensor} = \binom{2M+2N}{2} \int V_{(r_{12})}^{tensor}\, t w_{12}^{3T}\, dx_1\, dx_2$$

Die Integration über den Raumwinkel ergibt aber Null, da $(1 - 3\zeta^2/r^2)$ im Mittel verschwindet.
Die tensorielle Wechselwirkung liefert also in unserem Modell keinen Beitrag zur Energie.

Ebenso bringt die Spin-Bahnkopplung keinen Energiebeitrag :
Der Wechselwirkungsoperator dafür ist

$$(\mathcal{L}\mathcal{S})_{ik} = \frac{1}{2}\left(\vec{r}_{ik} \times \frac{\hbar}{i} \operatorname{grad}_{\vec{r}_{ik}}\right)(\vec{\sigma}_i + \vec{\sigma}_k)$$

Für Spinsingulettzustände ist $\mathcal{L}\mathcal{S}_{ik}$ ebenfalls Null.
Berechnen wir die Triplettwahrscheinlichkeitsdichten

$$(\mathcal{L}\mathcal{S}) w^{3S,3T} = \frac{\langle \Psi | (\mathcal{L}\mathcal{S}) \vec{W}^{3S,3T} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}$$

so zeigt sich, daß sie beide verschwinden, allein aus der Bedingung $f_{\vec{k}} = f_{-\vec{k}}$.

Nur die skalare Wechselwirkung trägt demnach in unserem Modell zur potentiellen Energie bei. Sie können wir aus den Abstandswahrscheinlichkeiten angeben.

Die Abstandswahrscheinlichkeiten verhalten sich für kleine Abstände ebenso, wie im vorher diskutierten Fall einfacher Systeme :
Wir können nie erreichen, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte unter die Werte des Fermischen Grundzustandes absinkt, ganz gleich, wie wir auch unseren Ansatz wählen. Dies hat zwei Konsequenzen :
Einmal muß, wie oben, das Potential im Mittel anziehend sein, um in unserem Modell einen vom Fermischen Grundzustand abweichenden, energetisch tieferen Zustand zu geben. Da die Kernkräfte dieser Forderung genügen, scheint unser Ansatz brauchbar für Kernmaterie zu sein.

Wir können aber - zum andern - trotzdem nicht jede Form der Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung verwenden. Die aus den Streudaten erschlossenen Kernkräfte werden für kleine Abstände stark abstoßend; die Teilchen haben einen Hard-Core. In unmittelbarer Umgebung eines Nukleons sinkt also die Wahrscheinlichkeit auf Null ab, ein zweites Teilchen dort zu finden. Dieses Verhalten können wir aber mit unserem Ansatz nie beschreiben. Alle Potentiale mit einem Hard-Core scheiden deshalb für unser Modell aus.

Berechnung der Nukleonenbindungsenergie in Kernmaterie ohne Berücksichtigung des Hard-Core

Man muß erst bei hohen Energien Potentiale mit einem Hard-Core verwenden, um die Streudaten beschreiben zu können. Andererseits scheinen aber nur solche Potentiale die Sättigungseigenschaften der Kernkräfte richtig wiederzugeben.
Potentiale ohne Hard-Core ergeben eine zu große Kerndichte und eine zu hohe Bindungsenergie.

Nun konnten aber Wild und Wildermuth[8] zeigen, daß solche Potentiale die Bindungsenergie der Nukleonen in Kernmaterie recht gut wiedergeben, wenn die Nukleonendichte nicht aus einem Variationsverfahren bestimmt, sondern empirisch vorgegeben wurde. Sie berechneten allerdings die Bindungsenergie nur aus dem Fermischen Grundzustand.

Im Rahmen unseres Modells können wir diese Ergebnisse prüfen. Betrachten wir ein System aus gleichviel Protonen und Neutronen. Wir bestimmen den Grundzustand als Minimum der Gesamtenergie, wobei wir die Nukleonendichte willkürlich festhalten. Wie in (23) berücksichtigen wir nur die nichtdiagonalen Anteile der potentiellen Energie. Die Selbstenergie sei also konstant für alle Zustände. In den Abstandswahrscheinlichkeiten (36) enthält nur w^{1T} nichtdiagonale Glieder. Diese allein müssen wir für die Variation in Betracht ziehen.

Die Gesamtenergie, bezogen auf den Fermischen Grundzustand als Nullpunkt, ist dann

$$\bar{E} = 2\sum_{k>k_f} \varepsilon_k h_k - 2\sum_{k<k_f} \varepsilon_k (1-h_k) + \sum_{kk'} v^{1T}_{kk'} \sqrt{h_k(1-h_k)\,h_{k'}(1-h_{k'})}$$
$$+ 2\sum_{k} \varepsilon_k h'_k - 2\sum_{k} \varepsilon_k (1-h'_k) + \sum_{kk'} v^{1T}_{kk'} \sqrt{h'_k(1-h'_k)\,h'_{k'}(1-h'_{k'})} \qquad (38)$$

Wir suchen das Minimum von $(E - 2\lambda M - 2\lambda' N)$. Durch partielle Differentiation nach h_k erhalten wir das Integralgleichungssystem

$$0 = 2(\varepsilon_k - \lambda)\sqrt{h_k(1-h_k)} + (1-2h_k)\sum_{k'} v^{1T}_{kk'} \sqrt{h_{k'}(1-h_{k'})} \qquad (39)$$

Die entsprechenden Gleichungen für h'_k und λ' sind damit identisch.
Die Lösungsmethoden haben wir bereits behandelt. Wir können sie unverändert übernehmen, da die Integralgleichungen (39) und (25) völlig übereinstimmen.

$v^{1T}_{kk'}$ berechnen wir aus den Angaben von Wild und Wildermuth :

$$V^{1T}(r_{ik}) = V_0 \frac{e^{-\gamma r_{ik}}}{\gamma r_{ik}} \qquad V_0 = -38{,}9 \text{ MeV} \qquad \gamma = 0{,}8 \cdot 10^{+13} \text{ cm}^{-1}$$

Die zugehörigen Fouriertransformierten sind

$$V_{kk'}^{1T} = \frac{4\pi}{\Omega} \frac{V_0}{\gamma(\gamma^2 + (\vec{k}-\vec{k}')^2}$$

Aus Gleichung (30) bestimmen wir ε_0 :

$$1 = \frac{1}{2}\frac{4\pi}{\Omega}\sum_{k'} \frac{V_0^{1T}}{\gamma(\gamma^2+(\vec{k}_f-\vec{k}')^2} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{k'}-\lambda)^2+\varepsilon_0^2}}$$

$$= \frac{V_0^{1T}}{2\pi\gamma}\int_0^\infty \frac{k'}{2k_f} \ln\frac{\gamma^2+(k_f+k')^2}{\gamma^2+(k_f-k')^2} \cdot \frac{dk'}{\sqrt{(\frac{\hbar^2k'^2}{2m}-E_f-\lambda)^2+\varepsilon_0^2}}$$

Bei normalen Kerndichten (Kernradius = $1{,}4\cdot10^{-13}\,\mathrm{cm}\cdot A^{1/3}$) ist $k_f = 1{,}088\cdot10^{13}\,\mathrm{cm}$; $E_f = 24{,}54$ MeV .
Damit berechnet sich

$$\varepsilon_0^2 \approx 0{,}02\,E_f^2 \qquad \lambda = -0{,}02\,E_f$$

Wir erhalten also nach (28) die Verteilungsfunktion

$$h_k = h'_k = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\varepsilon_k + 0{,}02E_f}{\sqrt{(\varepsilon_k+0{,}02E_f)^2+0{,}02E_f^2}}\right)$$

Aus (38) bestimmen wir jetzt die Energieverschiebung ΔE pro Teilchen gegenüber dem von Wild und Wildermuth berechneten Wert des Fermischen Grundzustands von 14, MeV.

$$|\Delta E| < |\Delta E_{pot}| \approx 2\cdot10^{-3}E_f \approx 0{,}05\ \mathrm{MeV}$$

Die Bindungsenergie ändert sich also nur ganz geringfügig. Unser Modell liefert also eine nachträgliche Rechtfertigung der Rechnungen von Wild und Wildermuth, sofern man nicht sagen will, daß auch unser Ansatz durch seine inneren Beschränkungen nicht darüber hinauszuführen vermag.

Wir haben in dieser Arbeit gezeigt, welche Möglichkeiten der Zweiergruppenansatz bietet, ein Fermionensystem mit Wechselwirkung zu beschreiben. Mit ihm lassen sich Erwartungswerte von Systemen berechnen, die einer Störungsrechnung nicht zugänglich sind. Da er aber nur einen Teil des Lösungsraumes umfaßt, sind seine Anwendungsmöglichkeiten begrenzt.
Um den Zweiergruppenansatz zur allgemeinen Berechnung von Kernmaterie verwenden zu können, müßte ein Formalismus gefunden werden, der die Hard-Core-Wechselwirkung der Nukleonen mit einschließt. Ansätze dazu wurden von Nakamura[9] versucht, doch führten sie bisher zu keinem greifbaren Ergebnis.

Herrn Prof. Dr. H. Volz danke ich sehr für die Überlassung dieser interessanten Arbeit und für die vielen anregenden und fördernden Diskussionen, die ich mit ihm führen durfte.

Zunächst wollen wir $Q_N = \sum_{(\kappa)} f_{\kappa_1}^2 \cdots f_{\kappa_N}^2$ berechnen. Die erzeugende Funktion ist

$$F(\xi) = \prod_\kappa (1 + f_\kappa^2 \xi) \qquad \xi \text{ komplex}$$

denn nach dem Residuensatz wird

$$Q_N = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\prod_\kappa (1+f_\kappa^2 \xi)}{\xi^{N+1}} d\xi$$

Die Berechnung dieses Integrals erfolgt mit Hilfe der Sattelpunktsmethode.
Als Integrationsweg wählen wir einen Kreis um den Ursprung mit Radius z :

$$\xi = z e^{i\phi} \qquad d\xi = i z e^{i\phi} d\phi$$

$$Q_N = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\prod_\kappa (1+z f_\kappa^2 e^{i\phi})}{z^N e^{iN\phi}} d\phi$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left\{ \sum_\kappa \ln (1+z f_\kappa^2 e^{i\phi}) - iN\phi - N \ln z \right\} d\phi$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{\varphi(z,\phi)} d\phi$$

Nun entwickeln wir $\varphi(z,\phi)$ in eine Taylorreihe für an der Stelle $\phi = 0$:

$$\varphi = \sum_\kappa \ln (1+z f_\kappa^2) - N \ln z + \phi \left(i \sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2}{1+z f_\kappa^2} - iN \right)$$
$$- \frac{\phi^2}{2!} \sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2}{(1+z f_\kappa^2)^2} - \frac{\phi^3}{3!} i \sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2 (1 - z f_\kappa^2)}{(1+z f_\kappa^2)^3}$$
$$+ \frac{\phi^4}{4!} \sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2 (1 - 4 z f_\kappa^2 + z^2 f_\kappa^4)}{(1+z f_\kappa^2)^4} + \cdots$$

z wird so bestimmt, daß $\frac{\partial}{\partial \phi} \varphi(z,\phi) \Big|_{\phi=0} = 0$
Die Bestimmungsgleichung für z ist also

$$\sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2}{1+z f_\kappa^2} = N$$

Damit erhalten wir

$$Q_N = \frac{e^{\varphi(z)}}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \exp\left\{ - \frac{\phi^2}{2!} \sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2}{(1+z f_\kappa^2)^2} - \frac{\phi^3}{3!} i \sum_\kappa \frac{z f_\kappa^2 (1 - z f_\kappa^2)}{(1+z f_\kappa^2)^3} + \cdots \right\} d\phi$$

Die Summation über k ersetzen wir durch eine Integration. Außerdem erstrecken wir die Grenzen der Integration über ϕ

bis ins Unendliche; die Exponentialfunktion fällt so steil ab, daß sich dadurch der Wert des Integrals nicht ändert.

$$Q_N = \frac{e^{Q(z)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{\phi^2}{2} 3N \int_0^{\infty} \frac{u^2 z f_u^2}{(1+z f_u^2)^2} du \cdot \left[1 + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{\phi}{3} i \left(\int_0^{\infty} \frac{u^2 z f_u^2 (1-z f_u^2)}{(1+z f_u^2)^3} du \right) \left(\int \frac{u^2 z f_u^2}{(1+z f_u^2)^2} du \right)^{-1} + \dots \right]\right\} d\phi$$

Da N sehr groß sein soll, ist der Integrand nur für $\phi \ll 1$ wesentlich von Null verschieden. Bei der Integration brauchen wir deshalb nur die niedrigste Potenz von ϕ zu berücksichtigen.

$$Q_N = \frac{e^{Q(z)}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\phi^2 \frac{3N}{2} \int_0^{\infty} \frac{u^2 z f_u^2}{(1+z f_u^2)^2} du \right\} d\phi$$

$$= \frac{\prod_k (1+z f_k^2)}{2\pi \cdot z^N} \left(\frac{2\pi}{3N \int_0^{\infty} \frac{u^2 z f_u^2}{(1+z f_u^2)^2} du} \right)^{1/2}$$

Hieraus lassen sich nun leicht die Formeln (12) und (17) berechnen :

$$Q_{N-1}^{\alpha} = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\prod_k (1+\zeta f_k^2)}{(1+\zeta f_\alpha^2)\,\zeta^N} d\zeta = Q_N \frac{\partial}{\partial f_\alpha^2} (\ln Q_N)$$

$$Q_{N-2}^{\alpha,\beta} = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{\prod_k (1+\zeta f_k^2)}{(1+\zeta f_\alpha^2)(1+\zeta f_\beta^2)\,\zeta^{N-1}} d\zeta = Q_{N-1}^{\alpha} \frac{\partial}{\partial f_\beta^2} (\ln Q_{N-1}^{\alpha})$$

$$= Q_N \frac{\partial}{\partial f_\alpha^2} (\ln Q_N) \cdot \frac{\partial}{\partial f_\beta^2} \left(Q_N \frac{\partial}{\partial f_\alpha^2} (\ln Q_N) \right)$$

$$Q_{N-1}^{\alpha,\beta} = Q_{N-1}^{\alpha} - f_\beta^2 Q_{N-2}^{\alpha,\beta}$$

Bis auf Glieder der Größenordnung 1/N ist

$$\frac{\partial}{\partial f_\alpha^2} \ln Q_N = \frac{\partial}{\partial f_\alpha^2} \ln (1+z f_\alpha^2) = \frac{z}{1+z f_\alpha^2}$$

Setzt man diesen Wert oben ein, so erhält man

$$Q_{N-1}^{\alpha} = Q_N \frac{z}{1+z f_\alpha^2}$$

$$Q_{N-1}^{\alpha,\beta} = Q_N \frac{z}{(1+z f_\alpha^2)(1+z f_\beta^2)}$$

$$Q_{N-2}^{\alpha,\beta} = Q_N \frac{z^2}{(1+z f_\alpha^2)(1+z f_\beta^2)}$$

Damit sind die behaupteten Formeln bewiesen.

Literaturverzeichnis

1) G. Seegmüller, "Die Verwendung von Zweiteilchen-Eigenfunktionen zur wellenmechanischen Beschreibung einer Gesamtheit von Fermiteilchen mit Spin" Zulassungsarbeit zur wissenschaftlichen Prüfung für das Lehramt an Höheren Schulen im Jahre 1955 in Erlangen

2) K. Nakamura, Progress of Theor. Phys. 21 (1959), S.713

3) J. E. Mayer und M. G. Mayer, Statistical Mechanics (Wiley, 1940)

4) B. Kahn und G. B. Uhlenbeck, Physica V (1938), S.399

5) M. Born und K. Fuchs, Proc. Roy. Soc. London A 166 (1938), S.391

6) J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108 (1957), S.1175

7) N. N. Bogoliubov, J. Exptl. Theor. Phys. 34 (1958) S.58 Soviet Phys. 34 (1958), S.41

8) W. Wild und K. Wildermuth, Zeitschr. für Naturf. 9a (1954), S.799

9) K. Nakamura, Progress of Theor. Phys. 24 (1960), S.1195

Inhalt

Einleitung	3
Die Behandlung des Zweiergruppenansatzes nach Nakamura	7
Überführung eines Gruppenansatzes in einen Determinantenansatz aus ebenen Wellen	9
Berechnung der Erwartungswerte	12
Der Grundzustand von Systemen mit spinunabhängiger Wechselwirkung	17
Die Verallgemeinerung des Zweiergruppenansatzes für Kernmaterie	22
Berechnung der Nukleonenbindungsenergie in Kernmaterie ohne Berücksichtigung des Hard-Core	27
Schlußbemerkungen	30
Anhang	31
Literaturverzeichnis	33

Lebenslauf

Am 19.3.36 wurde ich, Martin Heim, als Sohn des Stadtschulrates Martin Heim und seiner Ehefrau Anna, geb. Böhm, in Nürnberg geboren.
Nach vierjährigem Besuch der Volksschule in Nürnberg, Eiland, Rothenburg o.T. und Burgthann trat ich im September 1946 in die Oberrealschule in Neumarkt/Opf ein. 1950 wechselte ich an die Oberrealschule Fürth/Bay über und legte dort 1954 die Reifeprüfung ab.
Im Wintersemester 1954/55 schrieb ich mich dann erstmals an der Universität Erlangen als Studierender der Physik ein. Die Vordiplomprüfung bestand ich im Mai 1957 mit der Note "gut".
Im März 1958 begann ich am Institut für Theoretische Physik mit meiner Diplomarbeit "Zur Störungsrechnung am Zweiergruppenansatz des Fermigases". Am 24.2.60 bestand ich die Hauptdiplomprüfung mit der Note "gut".
Während meiner Diplomandenzeit war ich vom Wintersemester 1958/59 an als studentische Hilfskraft am Institut für Theoretische Physik beschäftigt.
Nach Ablegung der Diplomprüfung blieb ich zunächst als wissenschaftliche Hilfskraft bis 28.2.61 und seither als Verwalter der Dienstgeschäfte eines wissenschaftlichen Assistenten am gleichen Institut tätig.
Seit dem Sommersemester 1960 bin ich als Gasthörer an der Universität Erlangen eingeschrieben.

Martin Heim

Fotodruck

— Wiltrud Hogl, Erlangen Brüxer Straße 9, Telefon 1636 —